

기상 수소원자와 Cu(111) 표면에 흡착된 메틸기 사이의 저온 표면반응

김재연, 이지화

서울대학교 공업화학과

1. 서론

기상 수소원자는 Cu(111) 표면에 흡착된 CH₃를 효과적으로 추출할 뿐만 아니라,^{1,2} CH₃의 H 또한 추출한다고 보고되어 있으며,¹ 이는 Langmuir-Hinshelwood (LH) 메커니즘에 의한 반응이 일어나지 않은 낮은 표면온도에서 일어난다. 본 연구에서는 기존의 경우보다 훨씬 큰 CH₃ coverage, 그리고 새로운 형태의 수소원자 소스를 사용하여 반응생성물을 질량분석기로 직접 관찰하였으며, 새로이 에틸렌이 생성됨을 발견하고 그 생성 메커니즘을 제시하였다.

2. 실험

실험은 기저압력이 2×10^{-10} Torr인 초고진공 장치에서 이루어졌으며, 본 장치에는 이중으로 배기되는 질량분석기, 이온총, 수소원자 소스, CH₃ 라디칼 소스 등이 있다. 수소원자 소스는 e-bombardment 방법으로 텅스텐 튜브를 가열하고 그 사이에 수소분자를 흘려주어 수소원자가 생성되게 하였으며 냉각수가 흐르는 캔으로 cooling 및 radiation shielding을 하였다. CH₃ 라디칼은 아조메탄(azomethane, CH₃N₂CH₃)의 열분해(T ~ 970 K)를 통해 생성하였는데, 이는 기존의 CH₃I 흡착후 해리에 의한 CH₃(ad) 생성에 비해 수배 이상의 CH₃를 흡착시킬 수 있으며,³ CH₃ 흡착후 TPD를 통해 CH₃만이 흡착되어 있음을 확인하였다.

3. 결과 및 고찰

Cu(111) 표면에 H와 CH₃가 공흡착되어 있는 경우 TPD시 ~ 300 K에서 CH₄의 탈착이 관찰되었으며, 이는 200 K 이하의 온도에서는 LH 반응에 의한 CH₄의 생성이 일어나지 않음을 의미한다. 반면, CH₃가 포화 흡착된 Cu(111) 표면을 100 K에서 H 원자에 갑자기 노출시켰을 때 CH₄와 C₂H₄가 탈착하였으며, CH₄의 시그날은 t = 0에서 점프를 보인 후 서서히 감소하였고 C₂H₄는 t > 0에서 maximum을 보인 후 CH₃보다 훨씬 빨리 감소하였다. 한편 CH₃/Cu(111) 표면을 100 K에서 D 원자에 노출시킬 경우 CH_{4-x}D_x (x = 1~4), HD, C₂H₄의 탈착이 관찰되었다. CH_{4-x}D_x의 시그날은 x가 클수록 intensity가 작고 maximum을 보이는 시간이 길었으며, HD 시그날은 점프 후 감소하였고, C₂H₄는 H의 경우에서처럼 maximum을 보인 후 빠른 감소를 보였다. 이상의 결과는 D 원자에 의한 CH₃의 추출(CH₃D↑)뿐만 아니라, H의 추출(HD↑)에 이온 CH₂ 형성 후 에틸렌 생성(C₂H₄↑), CH₂에의 D 원자 부가반응 후 생긴 CH₂D의 추출(CH₂D₂↑) 등 여러 반응이 동시에 일어남을 의미한다. 본 연구에서는 표면온도와 CH₃ coverage 변화에 따른 반응생성물의 탈착 kinetics 및 intensity 변화를 알아보았으며 그 반응 메커니즘을 제시하였다.

참고문헌

- ¹Y.-S. Park, Ph. D. Thesis, Seoul National University (1996).
- ²C. T. Rettner, D. J. Auerbach, and J. Lee, J. Chem. Phys. **105**, 10115 (1996).
- ³C.-M. Chiang and B. E. Bent, Surf. Sci. **279**, 79 (1992).